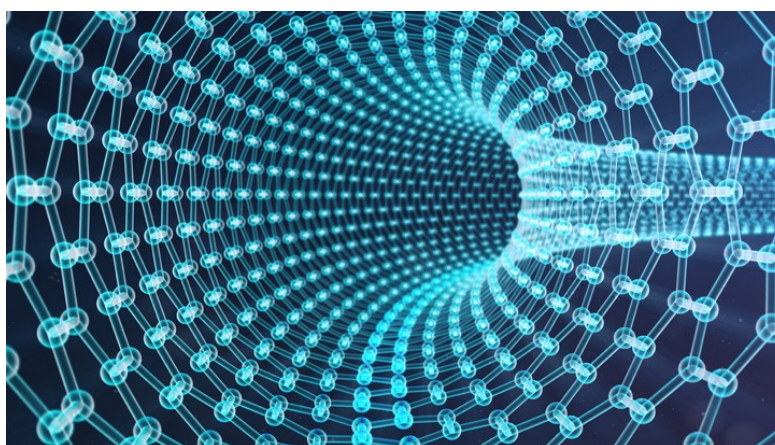


07/06/2019

"Klein tunneling": un fenomen exòtic amb implicacions en la velocitat dels dispositius electrònics de grafè



A causa de les seves propietats extraordinàries, el grafè s'estudia com un material nou molt prometedor per a l'electrònica. La dinàmica d'electrons en el grafè està modelada per l'equació de Dirac que presenta un fenomen exòtic de túnels anomenat "Klein tunneling": una transmissió perfecta d'electrons quan aquests incideixen perpendicularment a una barrera de potencial (independentment de l'alçada de la barrera).

Estructura molecular del grafè.

En aquest treball argumentem que l'explicació Bohmiana dels fenòmens quàntics proporciona un formalisme molt apropiat per discutir els temps de túnel, ja que la teoria ortodoxa (usual) de la mecànica quàntica és ambigua en la definició de temps de túnel tal i com va mencionar John Bell: "[La mecànica bohmiana] és, al meu entendre, molt instructiva. És equivalent experimentalment a la versió habitual en la mesura en que aquesta última no és ambigua." Les dificultats de la teoria ortodoxa per a la descripció del temps de túnel apareixen perquè la pròpia teoria no és capaç de decidir on està l'electró sense mesurar-lo explícitament. Malgrat aquesta ambigüitat conceptual ortodoxa, els temps de túnel són de gran importància pràctica per a la

indústria electrònica perquè estan vinculats a la freqüències de tall, és a dir, a la velocitat màxima dels dispositius electrònics. La teoria Bohmiana permet una definició precisa de les posicions dels electrons en termes de trajectòries Bohmianes, independentment de la seva mesura (figura 1). L'avantatge més important de la computació Bohmiana del anomenat "dwell time" per a aplicacions electròniques d'alta freqüència és la seva capacitat, no només per distingir entre els electrons transmesos (N_T) i reflectits (N_R^*), sinó també per discernir aquelles partícules reflectides que passen algun temps a la barrera (N_R). Atès que aquesta distinció no és possible en la mecànica quàntica ortodoxa, és per això que la discussió dels temps de túnel i de les freqüències de tall es converteixen en ambigüitats / controvertides amb aquesta teoria habitual.

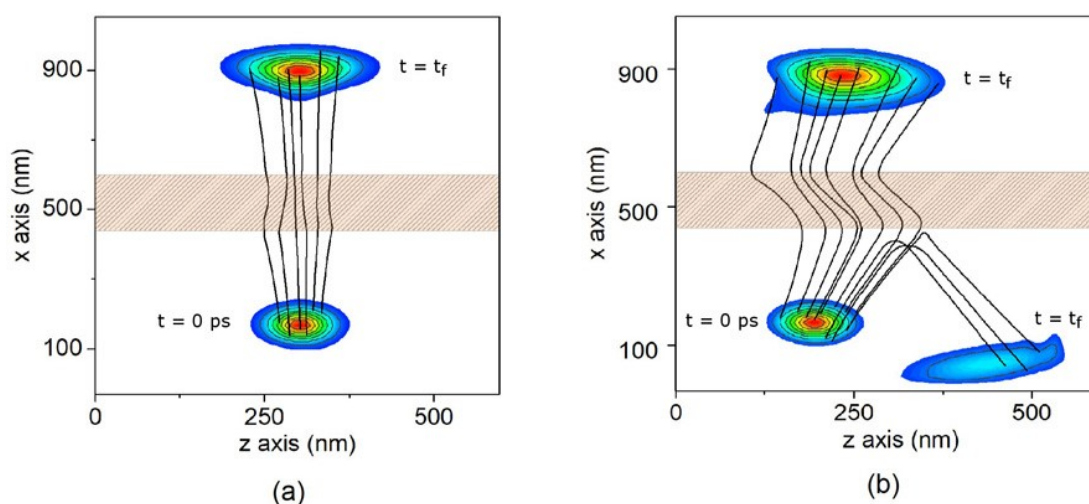


Figura 1. (a) La funció d'ona condicional de l'electró que incideix perpendicularment a una barrera en el grafè (a la regió de taronja ombrejada), juntament amb el conjunt de les trajectòries de Bohmian associades, es representen en els temps inicials i finals calculats a partir del simulador BITLLES. Com es pot veure, tant el paquet d'ona com en el conjunt de trajectòries, l'electró exhibeix el fenomen de "Klein tunneling" i totes les trajectòries travessen la barrera. (b) La mateixa trama d'un electró que afecta a la barrera en un angle diferent. Ara, no hi ha un túnel Klein complet i part del paquet d'ona, i algunes trajectòries, es reflecteixen. La part transmesa del paquet d'ona i les trajectòries transmeses segueixen una expressió semblant a la llei de Snell òptica.

Considerem un dispositiu de grafè de dos terminals, l'estructura de la qual (energia del punt de Dirac en funció de la posició x) es dibuixa a la figura 2. La naturalesa d'ona dels electrons ve donada per un bispinor solució de l'equació de Dirac.

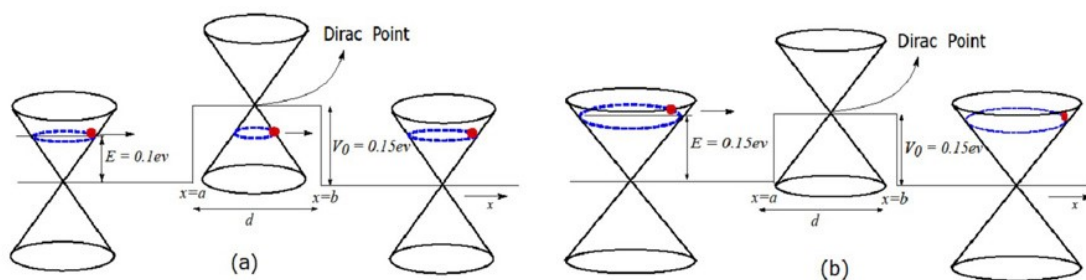


Figura 2. (a) Zona de barrera de túnels de Klein on l'electró, que incideix perpendicularment a la barrera, té una energia E menor que l'altura de la barrera V_0 . Els cons representen la dispersió de moments i d'energies del grafé en diferents posicions. L'electró disposa d'estats disponibles a la banda de valència de la regió de la barrera (energia cinètica negativa) que els permet túnel lliure. El coeficient de transmissió en aquests casos es troba proper a la unitat. (b) La mateixa trama per a un electró amb energia similar a l'altura de la barrera $E = V_0$. En aquest cas, l'electró ha d'ocupar el punt de Dirac a la regió barrera que gairebé no disposa d'estats energètics disponibles. En aquests escenaris la probabilitat de transmissió gairebé desapareix.

El càlcul correcte del temps de permanència (o "dwell time") a través de les trajectòries de Bohmian es calcula mitjançant l'ús del simulador BITLLES. A la figura 3 (a) mostrem com el nombre d'aquestes trajectòries varia amb l'angle d'incidència (θ_{kc}^-), les simulacions mostren que per $\theta_{\text{kc}}^- = 0$, es transmeten gairebé totes les partícules. Augmentar (θ_{kc}^-) condueix a un augment de les partícules reflectides. Per construcció, el comportament de N_T a la figura 3(a) reproduïx el coeficient de transmissió T de la figura 3(b). L'estimació del retard actual en un dispositiu electrònic només té en compte les partícules que entren a la barrera, ja sigui N_T o N_R . Per tant, per a una descripció inequívoca dels temps de túnel, és molt important classificar i descartar la contribució de les trajectòries N_R^* que no contribueixen a la corrent d'electrons que després determina els temps de túnel. En la computació ortodoxa, només amb el bispinor (sense trajectòries), N_T , N_R i N_R^* no es poden tractar per separat i la mencionada ambigüitat ortodoxa apareix.

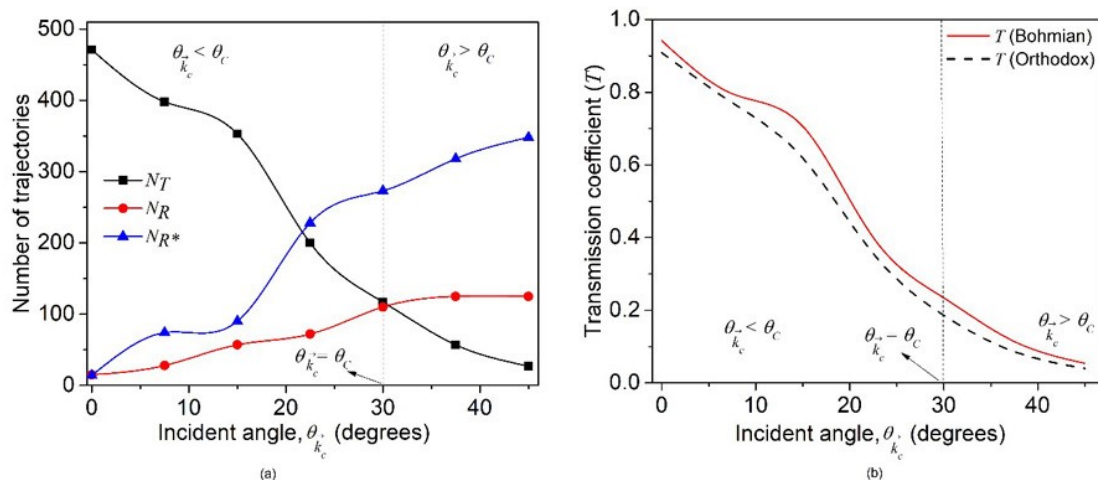


Figura 3. (a) Nombre de partícules transmeses, N_T , partícules que entren a la barrera però que eventualment es reflecteixen, N_R i partícules que es reflecteixen abans d'entrar a la barrera N_{R^*} en funció de l'angle d'incidència. (b) Coeficient de transmissió en funció de l'angle d'incidència calculat a partir de la mecànica quàntica ortodoxa (línia negra discontinua) i de les trajectòries de Bohmian (línia vermella sòlida).

En conclusió, hem demostrat la capacitat de la mecànica Bohmiana per parlar dels temps de túnel en el grafè i mostrem que els electrons amb energies cinètiques positives o negatives en aquests materials poden moure's en direcció arbitrària, però amb una velocitat constant (Fermi) degut a que l'anomenat "Klein tunneling" és, de fet, no un fenomen túnel genuí, sinó un fenomen d'interferència d'ones.

Devashish Pandey, Xavier Oriols
 Departament d'Enginyeria Electrònica
 Universitat Autònoma de Barcelona
Xavier.Oriols@uab.cat

Referències

[View low-bandwidth version](#)